

Research Paper

Study of Thermal Conductivity of Si and GaAs Quantum Nanowires¹

Ghassem Ansaripour^{2*}, Saeed Emadi Azami³

Received: 2019.09.26

Accepted: 2020.01.25

Abstract

The thermal conductivity in one-dimensional devices, including semiconducting nanowires of silicon and gallium arsenide is calculated and plotted. The method used is solving the Boltzmann equation for phonon scattering. In case of purely specular interface scattering, the thermal conductivity is found to be high in silicon and gallium arsenide nanowires. The thermal conductivity increases with increasing nanowire's diameter. In this work two different models for thermal conducting have been investigated. The first model solves the Boltzmann equation and finds solutions with the relaxation time approximation, and the other is a self-consistent solution of the Boltzmann equation. The answers in these two solutions are combined. The results show that the thermal conductivity in Si and GaAs semiconductor nanowires is reduced nearly 0.21 and 0.19 respectively, than that of bulk devices in agreement to the reported data. It is found that the thermal conductivity of gallium arsenide nanowire is lower than that of silicon nanowire and in comparison to recent published data for the Si nanowires with smaller diameter, it is overestimated and for nanowires with larger diameter is underestimated which could be due to ignoring the optical phonons decay to acoustic phonons and the effect of surface roughness on the thermal conductivity.

Keywords: *Semiconductor Nanowire, Thermal Conductivity, Scattering rate, Boltzmann Equation.*

¹ DOI: 10.22051/jap.2020.28469.1135

² Associate Professor, Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran. (Corresponding Author). Email: gansaripour@basu.ac.ir

³ MSc in Physics, Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran. Email: saeid.emadi@yahoo.com

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا

سال نهم، پیاپی ۱۸، پاییز ۱۳۹۸

مقاله پژوهشی

مطالعهٔ رسانش گرمایی نانوسیم‌های کوانتومی Si و GaAs^۱

قاسم انصاری پور^{۲*}، سعید عمادی اعظمی^۳

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۰۷/۰۴

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۱۱/۰۵

چکیده

در این مقاله رسانندگی گرمایی در یک دستگاه یک‌بعدی، شامل نانوسیم‌های نیم‌رسانا با جنس سیلیکن و گالیوم آرسنیک محاسبه و رسم شده است. روش به کاررفته حل معادله بولتزمن برای پراکندگی فونونی است. در مواردی که پراکندگی خالص فصل مشترک باشد، رسانندگی هم در نانوسیم سیلیکنی و گالیوم آرسنیکی مقدار بیشتری را نشان می‌دهد. رسانندگی با افزایش قطر نانوسیم افزایش می‌یابد. دو مدل متفاوت برای رسانندگی در این پژوهش بررسی شده است. مدل اول حل معادله بولتزمن و یافتن جواب‌ها با تقریب زمان واهلش است و دیگری حل خودسازگار معادله بولتزمن است. جواب‌ها در این دو حل با هم تلفیق شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که رسانندگی گرمایی در نانوسیم‌های نیم‌رسانای Si و GaAs به ترتیب تقریباً برابر ۰/۲۱ و ۰/۱۹ مقادیر نظیرشان در سامانه‌های انبوه کاهش می‌یابد که با داده‌های گزارش شده توافق دارد.

^۱ DOI: 10.22051/jap.2020.28469.1135

^۲ دانشیار، گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران. (نویسنده مسئول).

gansaripour@basu.ac.ir

^۳ دانش آموخته کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران.

saeid.emadi@yahoo.com

همچنین، نشان داده شده است که رسانندگی گرمایی نانوسیم گالیوم آرسنیک از مقدار مشابه آن در نانوسیم سیلیکن کمتر و در مقایسه با نتایج تجربی منتشر شده اخیر برای نانوسیم‌های Si متناظر با قطر کمتر، بیشتر و برای نانوسیم‌های با قطر بیشتر، کمتر است که احتمالاً به سبب لحاظ نشدن واپاشی فونون‌های اپتیکی به فونون‌های صوتی و اثر زبری سطح در رسانندگی گرمایی است.

واژگان کلیدی: نانوسیم نیم‌رسانا، رسانندگی گرمایی، نواخت پراکندگی، معادله بولتزمن.

۱. مقدمه

هم چنان که تعداد ترانزیستورها به عنوان پیشگامان ریزپردازنده‌های رده بالا به سمت ۲۰۰ میلیون هدف گذاری می‌شوند و ابعاد شکلی آن‌ها به سوی مقیاس نانو کوچک می‌شود، خواص گرمایی نانو ساختارهای نیم‌رسانا توجه چشمگیری را به خود جلب کرده است.

حرارت را در نیم‌رساناها اغلب فونون‌های صوتی ترابرد می‌کنند. مدل‌های تحلیلی رسانندگی گرمایی معمولاً بر اساس معادله ترابرد بولتزمن و تحت تقریب زمان واهلش مد منفرد توسعه می‌یابند.

رهیافت‌های گوناگونی جهت محاسبه رسانندگی گرمایی شبکه در نانوسیم‌ها به کار می‌رود. رهیافت اول بر اساس معادله مؤثر انبوهه برای رسانندگی گرمایی شبکه است، که اصلاح پاشندگی فونون صوتی و سرعت گروه در یک نانوسیم ناشی از آثار محبوس شدگی فونونی را شامل می‌شود [۲، ۱]. [۲] روابط پاشندگی فونون صوتی نانوسیم‌های سطح آزاد و نگاه‌داشته را بر اساس معادله کشسانی محاسبه کرده است. نواخت پراکندگی مرزی به عنوان حالت حدی کم‌میر [۳] تخمین زده شد و هدایت حرارتی شبکه با استفاده از توزیع فونون‌های غیر محبوس محاسبه شد. اما این روش، تصحیحات تابع توزیع غیر تعادلی فونونی مربوط به پراکندگی مرزی را لحاظ نمی‌کند. هایدگارد و ماهان [۴] هدایت حرارتی در صفحه ابر شبکه‌های GaAs/AlAs را محاسبه کردند. آن دو با لحاظ کردن یک رابطه پاشندگی انبوهه همسانگرد مکعبی پارامترهای مدل را با دماهای طولی و عرضی دمای تجربی و بیشینه عددهای موج تعیین شده توسط ثابت شبکه GaAs، مدرج کردند.

در رهیافت دوم، برعکس، معادله رسانندگی گرمایی را با حل معادله خطی بولتزمن با شرایط مرزی معین تصحیح کرده، اما پاشندگی فونونی انبوهه و پویش آزاد میانگین فونون را لحاظ

می کنند. این روش از آثار محبوس شدگی فونونی هنگامی که اندازه افزاره با پوشش آزاد میانگین فونون مقایسه پذیر شده و دارای اهمیت می شود، چشم پوشی می کند.

در مقاله حاضر، تلفیقی از دو رهیافت اول و دوم را در نظر می گیریم. در این جا، رسانندگی گرمایی فونونی در یک نانوسیم نیم رسانا با ابعادی مقایسه پذیر با پوشش آزاد میانگین فونون صوتی پژوهش شده است. سازوکارهای پراکندگی شامل پراکندگی سه فونونی واگرد، پراکندگی اختلاف جرم، پراکندگی فونون-الکترون و پراکندگی مرزی است. سپس با استفاده از قاعده ماتیسین نواخت پراکندگی های فوق با یکدیگر جمع زده می شود. در دو قسمت بعد، صورت بندی نظری و نتایج محاسبات عددی ارائه شده و در بخش های ۴ و ۵، نتایج و بحث و نتیجه گیری داده می شود.

۲. مبانی نظری

اگر در طول میله ای یک شیب دمایی وجود داشته باشد، جریان گرمایی شارش پیدا می کند. یک فونون با انرژی $hw_s(\vec{q})$ و سرعت $c_s(\vec{q})$ در جهت \vec{q} ، به اندازه $hw_s(\vec{q})c_s(\vec{q})$ در جریان گرمایی سهم خواهد داشت. در این صورت جریان گرمایی خالص فونون توسط رابطه زیر داده می شود [۷۵]:

$$J_Q^{\Gamma} = \sum_{\vec{q},s} \mathcal{H}_{qs} hw_s(\vec{q}) c_s(\vec{q}) \quad (1)$$

که در آن، $c_s(q)$ ، w_s ، q ، s به ترتیب زیر نویس فونون با قطبش ویژه، بردار موج فونون، ثابت دیراک، بسامد فونون و $\mathcal{H}_{qs} = \bar{n}_{qs} - n_{qs}$ میزان انحراف تابع توزیع غیر تعادلی، n_{qs} ، از تابع توزیع تعادلی، \bar{n}_{qs} ، است. تابع توزیع تعادلی همان شکل معروف بوز-اینشتن را دارد که به صورت زیر است،

$$\bar{n}_{qs} = \frac{1}{\frac{hw_s(q)}{e^{K_B T}} - 1} \quad (2)$$

از طرفی، جریان گرمایی بر حسب شیب دمایی به صورت زیر تعریف می شود،

$$J_Q^{\Gamma} = -K_1^{\Gamma} \nabla T \quad (3)$$

که در آن، K_1 تانسور رسانش گرمایی است. بنابراین مسئله تعیین رسانندگی گرمایی اساساً به دست آوردن \mathcal{H}_{qs} است و برای این کار نیاز به حل معادله بولتزمن داریم. در حضور شیب دمایی در دی الکترونیک سازوکارهای پخش و پراکندگی مسئول تغییر نواخت تابع توزیع هستند. در حالت شارش گرمای پایا، معادله بولتزمن فونون به صورت زیر داده می شود،

$$\frac{\partial n_{qs}}{\partial t} \Big|_{drift} + \frac{\partial n_{qs}}{\partial t} \Big|_{scatt} = 0 \quad (4)$$

در معادله (۴)، $(\partial n_{qs}/\partial t)_{drift}$ تغییر تابع توزیع در حضور شیب دمایی بوده و برابر است با

$$\frac{\partial n_{qs}}{\partial t} \Big|_{drift} = -c_s(q) \cdot n_{qs} = -\left(c_s(q) \cdot n_{qs}\right) \frac{\partial n_{qs}}{\partial T} \quad (5)$$

تغییر، n_{qs} ، ممکن است مربوط به پراکندگی توسط فونون‌ها، ناخالصی‌ها، مرزها و ... باشد که این در معادله (۴) به صورت $(\partial n_{qs}/\partial t)_{scatt}$ نشان داده شده است. در تقریب زمان واهلش این جمله به صورت زیر داده می‌شود،

$$\frac{\partial n_{qs}}{\partial t} \Big|_{scatt} = \frac{\bar{n}_{qs} - n_{qs}}{t_{qs}(q)} \quad (6)$$

که در آن، $t_{qs}(q)$ زمان واهلش کلی است. با جاگذاری روابط (۵) و (۶) در معادله (۴) خواهیم داشت

$$-c_x \frac{\partial \mathcal{H}_{qs}}{\partial x} - c_y \frac{\partial \mathcal{H}_{qs}}{\partial y} - c_z \frac{\partial \mathcal{H}_{qs}}{\partial z} + \frac{\mathcal{H}_{qs}}{t_{qs}} = 0 \quad (7)$$

در این رابطه، c_i ها مؤلفه‌های سرعت گروه فونونی در راستای محورهای مختصات مربوطه است. در مسئله‌ای که ما می‌خواهیم حل کنیم یک سیم کوانتومی استوانه‌ای به قطر D با محوری در امتداد Z در نظر می‌گیریم. اگر شیب دمایی در امتداد این محور فرض شود، رابطه (۷) به شکل زیر در می‌آید،

$$c_x \frac{\partial \mathcal{H}_{qs}}{\partial x} + c_y \frac{\partial \mathcal{H}_{qs}}{\partial y} + \frac{\mathcal{H}_{qs}}{t_{qs}} = c_z \frac{\partial T}{\partial z} \frac{\partial \mathcal{H}_{qs}}{\partial T} \quad (8)$$

با فرض این که تابع توزیع به دلیل شیب دمایی با مقدار در حالت تعادلش تفاوت زیادی نکند، رابطه (۸) شکل زیر را که همان معادله بولتزمن خطی فونون است به خود می‌گیرد،

$$c_x \frac{\partial \mathcal{H}_{qs}}{\partial x} + c_y \frac{\partial \mathcal{H}_{qs}}{\partial y} + \frac{\mathcal{H}_{qs}}{t_{qs}} = c_z \frac{\partial T}{\partial z} \frac{\partial \bar{n}_{qs}}{\partial T} \quad (9)$$

۳. رسانندگی گرمایی شبکه

بنا بر رهیافت مرجع [۸] و با حل معادله بولتزمن خطی فونون، (۹)، تحت شرایط مرزی رسانندگی گرمایی نانوسیم، K_1^{wire} ، به صورت رسانندگی گرمایی انبوهه، K_1 ، و انحراف آن به دلیل شرایط مرزی از سطوح، DK_1^{wire} ، به شکل زیر بیان می‌شود [۷]،

$$K_1^{wire}(T, p) = K_1(T, p) - DK_1^{wire}(T, p) \quad (10)$$

در این رابطه

$$K_1 = \frac{K_B}{2p^2c} \left(\frac{K_B T}{h} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} dx \tau_{qs} x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (11)$$

که در آن، q_B, T, c, K_B به ترتیب ثابت بولتزمن، سرعت گروه فونون، دما، دمای دبای و $x = hw / K_B T$ است و $DK_1^{wire}(T, p)$ به صورت زیر داده می‌شود،

$$\Delta K_1^{wire}(T, p) = \frac{24}{\pi} \frac{K_B}{2\pi^2 c} \left(\frac{K_B T}{h} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} dx \tau_{qs} x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} G(\eta(x), p) \quad (12)$$

η نسبت قطر نانوسیم، D به پویش آزاد میانگین فونون، $\Lambda(x)$ است که به صورت با یکدیگر رابطه دارند،

$$\eta(x) = \frac{D}{\Lambda(x)} \quad \Lambda(x) = c(x) \tau(x) \quad (13)$$

تابع G چنین است [۵]

$$G(\eta(x), p) = (1-p)^2 \sum_{j=1}^{\infty} j p^{j-1} \int_0^1 dy \sqrt{(1-y^2)} S_4(j\eta y) \quad (14)$$

و تابع S به صورت زیر تعریف می‌شود [۵]،

$$S_n(u) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} e^{\frac{u}{\sin \theta}} \cos^2(\theta) \sin^{n-3}(\theta) d\theta \quad (15)$$

و با جایگذاری نهایتاً به دست می‌آوریم

$$K_1^{wire} = \frac{K_B}{2p^2c} \left(\frac{K_B T}{h} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} dx \tau_{qs} x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} (1 - G(h(x), p)) \quad (16)$$

در رابطه (۱۴)، p برابر یک و دو می‌باشد و برای $p \rightarrow 1$ رسانندگی با رسانندگی ماده انبوهه برابر می‌شود. با توجه به این که در پراکندگی آینه‌ای کامل تابع توزیع همانی می‌شود که درون ماده انبوهه است، وقتی که $p \rightarrow 0$ تنها جمله اول را در جمع‌زنی رابطه (۱۴) باید لحاظ کرد. هنگامی که قطر نانوسیم خیلی بزرگ شود برای تمام مقادیر p ، ΔK_1^{wire} به سمت صفر می‌رود.

در این جا، فرایندهای مقاومتی را در نظر می‌گیریم. این فرایندها عبارتند از پراکندگی سه‌فونونی و اگر U^1 ، پراکندگی اختلاف جرم M^1 ، پراکندگی از مرزها B و پراکندگی الکترون-فونون e -ph در نهایت، پراکندگی کل به صورت زیر به دست می‌آید [۷]،

¹ Three-phonon umklapp scattering

$$\frac{1}{\tau_{qs}} = \frac{1}{\tau_U} + \frac{1}{\tau_M} + \frac{1}{\tau_B} + \frac{1}{\tau_{e-ph}} \quad (17)$$

پراکندگی سه‌فونونی که در دماهای بالا (دمای اتاق و بیشتر) اتفاق می‌افتد و برای ما از اهمیت بسیار بیشتری برخوردار است با رابطهٔ زیر داده می‌شود [۹]،

$$\frac{1}{\tau_U} = 2g^2 \frac{K_B T}{mV_0} \frac{w^2}{w_D} \quad (18)$$

در این رابطه، γ پارامتر غیر هماهنگ گرونایزن^۱ است، μ مدول برشی، V_0 حجم هر اتم و ω_D بسامد دمای است. زمان واهلش مربوط به تفاوت جرم به صورت زیر داده می‌شود [۷]،

$$\frac{1}{t_M} = \frac{V_0 G w^4}{4pV^3} \quad (19)$$

در رابطه (۱۹)، Γ قدرت پراکندگی جرم متفاوت است و با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود [۷]،

$$G = \sum_i f_i \left(1 - \frac{M_i}{M}\right)^2 \quad (20)$$

که در آن، f_i توزیع جرمی اتم‌های ناخالصی به جرم M_i را نشان می‌دهد به گونه‌ای که داریم $\bar{M} = \sum_i f_i M_i$. پراکندگی از سطوح مرزی را توسط پارامتر زبری p نشان می‌دهیم و آن را به صورت زیر تعریف می‌کنیم [۷]،

$$\frac{1}{\tau_B} = \frac{V}{D} (1-p) \quad (21)$$

وقتی $p=1$ باشد حالت پراکندگی کاملاً آینه‌ای رخ می‌دهد و این پراکندگی هیچ تأثیری در ترابرد گرمایی نخواهد داشت. در حالت دیگر، وقتی $p=0$ باشد زمان واهلش برابر $1 / t_B = V / D$ خواهد شد که دقیقاً برابر حالت حدی کرمیر است [۱۰]. وقتی چگالی اتم‌های ناخالصی کوچک باشد پراکندگی الکترون-فونون به صورت زیر بیان می‌شود [۱۱]،

$$\frac{1}{t_{e-ph}} = \frac{n_e e_1^2 w}{rV^2 K_B T} \sqrt{\frac{pm^* V^2}{2K_B T}} e^{\frac{m^* V^2}{2K_B T}} \quad (22)$$

که در آن، n_e چگالی الکترونی تراز رسانش، ϵ_1 ، پتانسیل تغییر شکل، ρ ، چگالی جرمی و m^* جرم مؤثر الکترونی است. در این جا فرض می‌کنیم محبوس شدن فونون‌ها قویاً اثری بر نواخت‌های پراکندگی الکترون-فونون ندارد [۱۲].
رابطهٔ پاشندگی فونونی به صورت زیر است [۷]،

¹ Mass-difference scattering

² Gruneisen

$$q_{d,t}^2 = \frac{\omega^2}{v_{d,t}^2} - q^2 \quad (23)$$

که در آن، q مؤلفه Z بردار موج فونون است و q_d و q_t دو پارامتر هستند.

در (۲۳)، $v_d = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ ، سرعت طولی و $v_t = \sqrt{\mu/\rho}$ سرعت عرضی موجی در نیم رساناست و λ و μ ثابت‌های لیم^۱ هستند. جواب رابطه پاشندگی فونونی را می‌توان به صورت زیر نوشت [۷]،

$$\omega_n = v_{d,t} \sqrt{q^2 + q_{d,m}^2} \quad (24)$$

که در آن، ω_n بسامد فونونی شاخه n است. با مشتق‌گیری عددی می‌توان سرعت گروه را به دست آورد،

$$V_n = \frac{\partial \omega_n}{\partial q} \quad (25)$$

نهایتاً با میانگین‌گیری روی همه سرعت‌های گروه ثابت در نوارهای مجزا سرعت گروه نهایی به صورت زیر به دست می‌آید،

$$c = \sum_n V_n (\hbar \omega) \frac{e^{-\frac{\hbar \omega}{k_B T}}}{\sum_m e^{-\frac{\hbar \omega}{k_B T}}} \quad (26)$$

در جدول ۱، ثابت‌های مورد نیاز در محاسبات درج شده است.

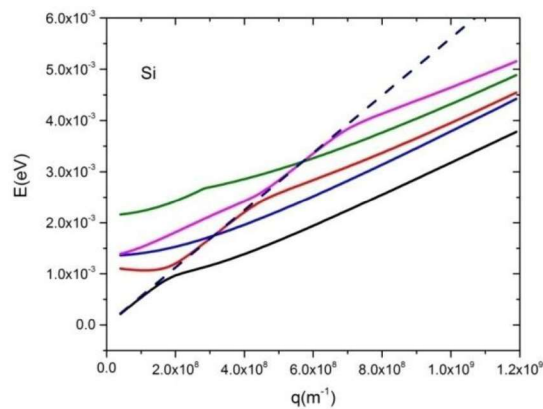
جدول ۱ ثابت‌های استفاده‌شده در محاسبات.

پارامتر	سیلیکن	گالیوم آرسنیک
g	[۱۴] ۱,۰۲	[۱۴] ۱,۲۳
q_D (K)	[۱۵] ۶۵۰	[۱۶] ۳۴۵
m	[۱۷] $6.6 \cdot 10^{10} \frac{N}{m^2}$	[۱۸] $3.28 \cdot 10^{10} \frac{N}{m^2}$
e_1	[۷] $9.5 eV$	[۱۶] $8.6 eV$
G	[۷] $8.35 \cdot 10^{-4}$	[۷] $8.35 \cdot 10^{-4}$
v_d	[۷] $v_d = 8470 \frac{m}{s}$	[۱۳] $5700 \frac{m}{s}$
v_t	[۷] $v_t = 5340 \frac{m}{s}$	[۱۳] $3350 \frac{m}{s}$

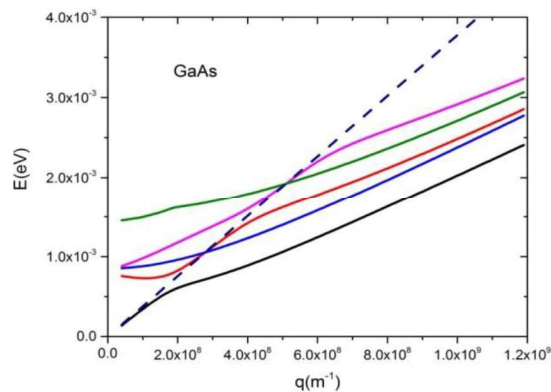
¹ Lame

۴. نتایج و بحث

تمام شکل‌ها و نمودارهای ارائه‌شده در این مقاله با استفاده از نرم‌افزار محاسباتی متلب (Matlab) محاسبه و رسم شده است. در شکل ۱ نمودار پاشندگی فونونی را برای بلور سیلیکن انبوهه با منحنی نقطه‌چین نشان داده‌ایم و همان‌گونه که مشاهده می‌کنید، وقتی بردار موج به سمت صفر می‌رود شاخهٔ اول فونونی در نانوسیم دقیقاً با شاخهٔ صوتی بلور سیلیکن بر روی هم می‌افتند. در این شکل، خطوط توپر پنج شاخهٔ اول یک نانوسیم 20 نانومتری را نشان می‌دهند. می‌توان با مشتق‌گیری از نمودار پاشندگی بسامد بر حسب بردار موج سرعت دقیق هر شاخه را به دست آورد. در مورد شاخهٔ اول برای مقادیر بسیار کوچک بردار موج، سرعت نانوسیم بسیار به مقدار سیلیکن انبوهه نزدیک است. شکل ۲ مانند شکل ۱، ولی برای گالیوم آرسنیک است.

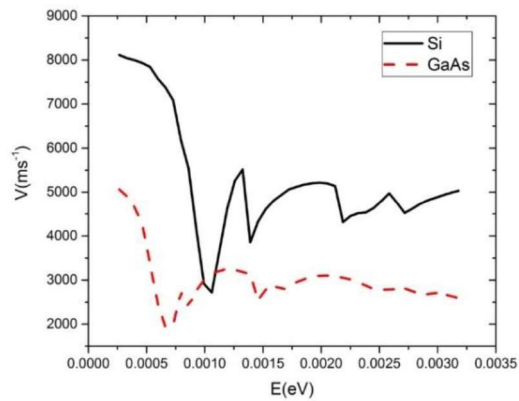


شکل ۱ نمودار پاشندگی فونونی برای ۵ شاخهٔ اول یک نانوسیم نیم‌رسانای سیلیکنی به قطر 20 نانومتر.

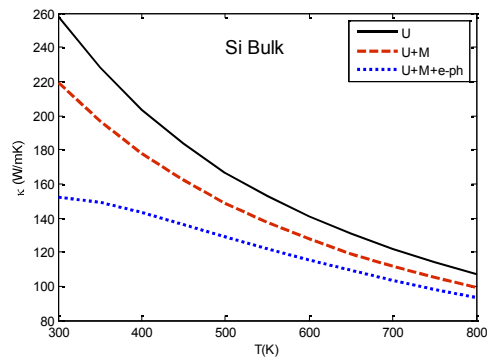


شکل ۲ نمودار پاشندگی فونونی برای ۵ شاخهٔ اول یک نانوسیم نیم‌رسانای گالیوم آرسنیک به قطر 20 نانومتر.

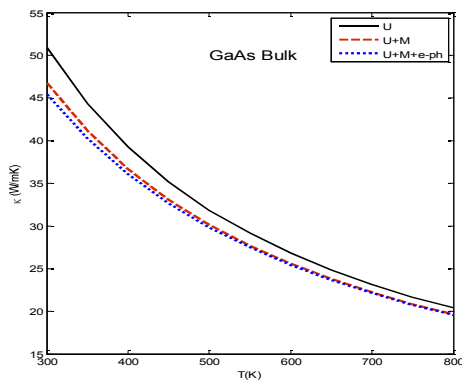
از مقایسه نمودارهای (۱) و (۲) به این نتیجه می‌رسیم که دامنه انرژی فونونی در سیلیکن بزرگ‌تر از گالیوم آرسنیک است و همچنین سرعت گروه در سیلیکن بیشتر از گالیوم آرسنیک است.



شکل ۳ نمودار سرعت متوسط گروه فونونی در دمای ۳۰۰ کلوین برای نانوسیم‌هایی از جنس سیلیکن و گالیوم آرسنیک.



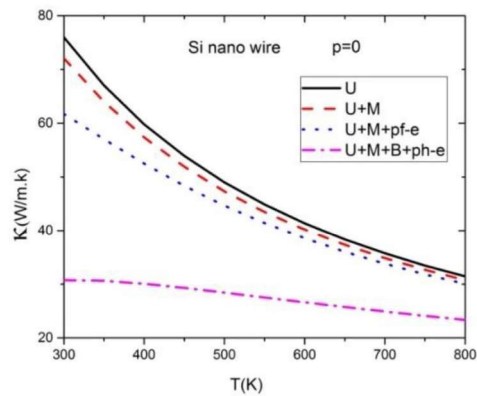
شکل ۴ نمودار رسانندگی گرمایی برای سیلیکن انبوه [۷].



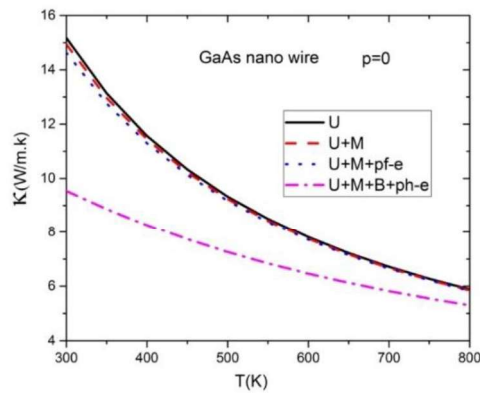
شکل ۵ نمودار رسانندگی گرمایی برای گالیوم آرسنیک انبوه.

در شکل ۳ مشاهده می‌کنیم که در دمای ۳۰۰ کلوین سرعت متوسط فونونی با افزایش انرژی به شدت نوسان می‌کند و این نوسانات برای سیلیکن حول سرعتی برابر ۴۵۰۰ متر در ثانیه دارای دامنه‌هایی میراست. این موضوع برای گالیوم آرسنیک نیز دقیقاً تکرار می‌شود، با این تفاوت که سرعت حول مقدار 3000m/s نوسان خواهد کرد.

در شکل‌های ۴ و ۵، نمودار رسانش گرمایی برای انبوههٔ سیلیکن و گالیوم آرسنیک در گسترهٔ دمایی ۳۰۰ تا ۸۰۰ کلوین رسم شده است. در هر دو شکل منحنی‌های توپر و خط‌چین و نقطه‌چین به ترتیب با لحاظ پراکندگی واگرد (U)، مجموع پراکندگی‌های واگرد و اختلاف جرم (U+M) و مجموع پراکندگی‌های واگرد و اختلاف جرم و فونون-الکترون (U+M+e-ph) محاسبه و رسم شده‌اند. همان‌گونه که مشاهده می‌کنید در هر دو حالت، با افزایش دما رسانندگی گرمایی کاهش می‌یابد. همچنین، این دو شکل نشان می‌دهند که پراکندگی غالب از نوع پراکندگی واگرد بوده و باعث کم اهمیت شدن نقش بسامدهای بزرگ می‌شود.

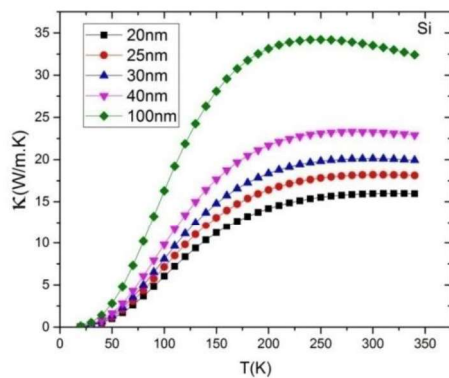


شکل ۶ نمودار رسانندگی گرمایی نانوسیم سیلیکنی به قطر ۲۰ نانومتر.

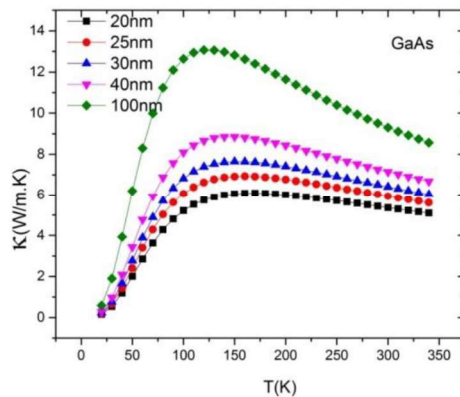


شکل ۷ نمودار رسانندگی گرمایی نانوسیم گالیوم آرسنیک به قطر ۲۰ نانومتر.

در شکل‌های ۶ و ۷، نمودار رسانش گرمایی برای نانوسیم‌های سیلیکونی و گالیوم آرسنیک با قطر ۲۰ نانومتر با استفاده از رابطه (۱۶) محاسبه و رسم شده است. نام‌گذاری درون این دو شکل شبیه شکل‌های ۵ و ۶ است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، رسانندگی گرمایی با افزایش دما روند کاهشی دارد. سازوکارهای پراکندگی در دماهای بالا به یکدیگر نزدیک می‌شوند. همچنین، دو شکل فوق نشانگر آن است که پراکندگی مرزی اثر عمده‌ای در کاهش رسانندگی گرمایی نانوسیم‌ها دارد.



شکل ۸ نمودار رسانندگی گرمایی برای نانوسیم‌های سیلیکونی با قطرهای مختلف به ازای تغییرات دمایی.



شکل ۹ نمودار رسانندگی گرمایی برای نانوسیم‌های گالیوم آرسنیک با قطرهای مختلف به ازای تغییرات دمایی.

نتایج محاسبات که در نمودارهای ۶ و ۷ نشان داده شده‌اند، در توافق با مراجع [۷، ۱۹] هستند. بالاخره در شکل‌های ۸ و ۹ نمودار تغییرات رسانندگی گرمایی را برای نانوسیم‌های سیلیکون و گالیوم آرسنیک با قطرهای مختلف بر حسب دما محاسبه و رسم کرده‌ایم. همان‌گونه که مشاهده

می‌کنید در دمای صفر رسانندگی گرمایی صفر است. این بدان علت است که در این دما اصلاً هیچ مد فونونی وجود ندارد که بخواهد رسانش را انجام دهد. با افزایش دما مدهای فونونی تولید می‌شوند و رسانندگی به سرعت افزایش می‌یابد. هر دو نمودار نشان می‌دهد که با افزایش قطر نانولوله‌ها رسانندگی گرمایی نیز افزایش می‌یابد که عمدتاً به علت کاهش نواخت پراکندگی مرزی است. همچنین، دو شکل فوق نشان می‌دهند که رسانندگی گرمایی برای دماهای بالاتر از ۱۷۰K برای نانوسیم‌های Si ثابت است و برای نانوسیم‌های GaAs تغییر چندانی نمی‌کند. همچنین، مقایسهٔ رسانندگی گرمایی نانوسیم‌های گالیوم آرسنیک با نانوسیم‌های سیلیکن با قطرهای یکسان افت شدیدی نشان می‌دهند که احتمالاً به دلیل پراکندگی زیاد غیر معمول اختلاف جرم است. این پراکندگی به دلیل کاهش سرعت گروه فونونی در دستگاه‌های نانومقیاس به طور چشمگیری افزایش می‌یابد.

نتایج شکل ۸ با داده‌های تجربی رسانندگی گرمایی نانوسیم‌های Si مرجع [۲۰] توافق دارند، اگرچه در نانوسیم‌های دارای قطر کوچک‌تر، بیشتر و در نانوسیم‌های دارای قطر بزرگ‌تر تا دمای خاصی کمتر است که دلیل این رفتار، شاید نادیده انگاشتن اثر تبدیل فونون‌های نوری به فونون‌های صوتی باشد [۲۱]. این مرجع نشان داده است که در نظر نگرفتن تبدیل فونون‌های اپتیکی به فونون‌های صوتی و نیز اثر زبری سطح در نانوسیم‌های دارای قطرهای بزرگ‌تر باعث کاهش در رسانندگی گرمایی محاسبه‌شده در مقایسه با مقادیر اندازه‌گیری‌شدهٔ متناظر در نانوسیم‌های Si بوده و با کاهش قطر نانوسیم‌ها اختلاف بین مقادیر محاسبه‌شده و تجربی کمتر می‌شود.

نتایج شکل ۹ نیز با داده‌های تجربی رسانندگی گرمایی نانوسیم‌های GaAs [۲۲] و GaN [۲۳] انطباق دارد. در مرجع [۱۸] خواص گرمایی نانوسیم‌های GaAs معلق با استفاده از گرمایش لیزری و بررسی دمای موضعی با طیف‌سنجی رامان مطالعه شده است و مقادیر رسانش گرمایی در گسترهٔ $8-36 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ تعیین شد که در توافق با نتایج ماست.

۵. نتیجه‌گیری

به طور خلاصه رسانندگی گرمایی سامانه‌های یک‌بُعدی شامل نانوسیم‌ها از رسانندگی گرمایی متناظرشان در سامانه‌های انبوه کمتر است. رسانندگی گرمایی در دمای صفر، صفر است و با افزایش دما رسانندگی شروع به افزایش می‌کند. این افزایش تا یک نقطه ادامه دارد و بعد از آن به دلیل چیره شدن پراکندگی‌های فونون-فونون رسانندگی کاهش می‌یابد. نمودار رسانندگی گرمایی

با افزایش دما روند کاهشی دارد. سازوکارهای پراکندگی در دماهای بالا به یکدیگر نزدیک می‌شوند در حالی که در دماهای پایین اختلاف زیادی با یکدیگر دارند. در هر دو صورت، نواخت پراکندگی اختلاف جرم تا یک نقطه، از نواخت پراکندگی الکترون-فونون کمتر است و از بسامد معینی به بعد این نرخ نسبت به پراکندگی الکترون-فونون پیشی می‌گیرد.

در نانوسیم سیلیکن در پراکندگی خالص پخشی ($p=0$)، رسانندگی تقریباً $0/21$ نسبت به پراکندگی خالص فصل مشترک ($p=1$)، سیلیسیم انبوه کاهش می‌یابد (شکل‌های ۴ و ۶). این موضوع برای نانوسیم گالیوم آرسنیک متناظر، $0/19$ است (شکل‌های ۵ و ۷). مقایسه دو نیم‌رسانای سیلیکن و گالیوم آرسنیک با یکدیگر به وضوح نشان می‌دهد که رسانندگی گرمایی در نانوسیم گالیوم آرسنیک کمتر از مقدار متناظر آن در نانوسیم سیلیکن است که می‌تواند به دلیل پایین‌تر بودن دمای دمای و نیز سرعت‌های فونونی GaAs نسبت به Si باشد.

منابع

- [1] Balandin A. and Wang K.L., Significant decrease of the lattice thermal conductivity due to phonon confinement in a free-standing semiconductor quantum well, *Physical Review B*, 58, 1544 (1998).
- [2] Khitun A., Balandin A. and Wang K.L, Modification of the lattice thermal conductivity in silicon quantum wires due to spatial confinement of acoustic phonons, *Superlattices Microstructures*, 26, 181-193 (1999).
- [3] Ziman J. M., *Electrons and Phonons* (Oxford University Press, Clarendon, 2001).
- [4] Hyldgaard P. and Mahan G. D., Phonon superlattice transport, *Physical Review B*, 56, 10754 (1997).
- [5] Sirvastava G. P., *The Physics of Phonons*, 1, 1st ed. Taylor & Francis Group, New York, 122-132, 1990.
- [6] Emadi Azami S., Thermal conduction in one dimensional semiconductor system, MSc. Thesis, Department of Physics, Faculty of Science, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran, 2017. (in Persian)
- [7] Zou J., Balandin A., Phonon heat conduction in a semiconductor nanowire, *Journal of Applied Physics*, 89, 2934-2938 (2001).
- [8] Walkauskas S., Broido D., Kempa K., Reinecke T., Lattice thermal conductivity of wires, *Journal of Applied Physics*, 85, 2579-2582 (1999).
- [9] Chung J. D., McGaughey H. A., Kaviani M., Role of phonon dispersion in lattice thermal conductivity modeling, *Journal of Heat Transfer*, 126, 376-380 (2004).
- [10] Casimir H., Note on the Conduction of heat in crystals, *Physica*, 5, 495-500 (1938).
- [11] Parrott J., Heat conduction mechanisms in semiconducting materials, *Revue Internationale Des Hautes Temperatures Et Des Refractaires*, 16, 393-403 (1979).
- [12] Nishiguchi N., Electron scattering due to confined and extended acoustic phonons in a quantum wire, *Physical Review B*, 54 1494 (1996).
- [13] Bannov N., Aristov V., Mitin V., Strosio M., Electron relaxation times due to the deformation-potential interaction of electrons with confined acoustic phonons in a free-standing quantum well, *Physical Review B*, 51, 9930 (1995).
- [14] Trommer R., Müller H., Cardona M., Vogl P., Dependence of the phonon spectrum of InP on hydrostatic pressure, *Physical Review B*, 21, 4869 (1980).

- [15] Liu J., X. Wang, D. Li, N.E. Coates, R.A. Segalman, D.G. Cahill, Thermal conductivity and elastic constants of PEDOT: PSS with high electrical conductivity, *Macromolecules*, 48, 585-591 (2015).
- [16] Barman S., Srivastava G., Thermal conductivity of suspended GaAs nanostructures: Theoretical study, *Physical Review B*, 73, 205308 (2006).
- [17] Kim J., Cho D.D., Muller R.S., Why is (111) silicon a better mechanical material for MEMS?, *Transducers' 01 Eurosensors XV*, Springer, 662-665 (2001).
- [18] Kayali S., GaAs material properties, JPL Publication 96, 25-33 (2006).
- [19] Huang M.-J., Chong W.-Y. and Chang T.-M., The lattice thermal conductivity of a semiconductor nanowire, *Journal of Applied Physics*, 99, 114318 (2006).
- [20] Li D., Wu Y., Kim P., Shi L., Yang P. and Majumdar A., Thermal conductivity of individual silicon nanowires, *Applied Physics Letters* 83, 2934-2938 (2003).
- [21] Kazan M., Guisbiers G., Pereira S., Correia M. R., Masri P., Bruyant A., Volz S., and Royer P., Thermal conductivity of silicon bulk and nanowires: Effects of isotopic composition, phonon confinement and surface roughness, *Journal of Applied Physics*, 107, 083503 (2010).
- [22] Soini M., Zardo I., Uccelli E., Funk S., Koblmüller G., Fontcuberta A., Morral i, Abstreiter G., Thermal conductivity of GaAs nanowires studied by micro-Raman spectroscopy combined with laser heating, *Applied Physics Letters*, 97, 263107 (2010).
- [23] Guthy C., Nam C.-Y., Fischer J. E., Unusually low thermal conductivity of gallium nitride nanowires, *Journal of Applied Physics*, 103, 064319 (2008).